

магнитный ток. Волновые уравнения возможно привести к системе телеграфных уравнений для радиальной линии передачи, заменив спектральные компоненты полей на модальные напряжения и ток в эквивалентной радиальной линии. В итоге, используя методы теории цепей, мы смогли заменить многослойную структуру диэлектрического волновода с собственной волной на эквивалентную цепь, состоящую из двух эквивалентных радиальных линий – для Н- и Е-волн. [2]

Эквивалентные радиальные линии состоят из многополюсников, описанных матрицами границ и слоев, связывающими модальные напряжения и токи на портах, и двухполюсников – концевых модальных направленных сопротивлений и проводимостей линий, соответствующих граничным условиям на внутренних и внешних слоях структуры.

Для расчета дисперсионных характеристик необходимо решить уравнение, вытекающее из условия поперечного резонанса – сумма направленных модальных сопротивлений (проводимостей) влево и вправо от опорного сечения линии должна равняться нулю. Решение уравнения для сопротивлений соответствует дисперсионным характеристикам Н-волн, а проводимостей – Е-волн. [3]

Таким образом, для получения дисперсионных характеристик оптоволоконной линии передачи был предложен новый метод расчета, основанный на методе функций Грина и методе эквивалентных радиальных линий. Такой подход требует только решения уравнений условий поперечного резонанса для расчета дисперсионных характеристик. При этом особенности эквивалентных радиальных линий предоставляют возможность для расчета дисперсионных характеристик у структур с теоретически неограниченным количеством слоев. С добавлением очередного слоя в математический аппарат добавляется матрица передачи границы и слоя, то есть количество вычислений увеличивается линейно. Такие особенности предлагаемого математического аппарата предоставляют широкие возможности для исследования и анализа многослойных оптоволоконных линий передачи.

*Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда (проект №14-19-01396).*

Список публикаций:

- [1] Неганов В. А., Осипов О. В., Раевский С. Б., Яровой Г. П. // *Электродинамика и распространение радиоволн. Учебник* / Под ред. В. А. Неганова и С. Б. Раевского. Изд. 4-е, доп. И перераб. – М.: Радиотехника, 2009. – 744 с., ил.
- [2] Мительман Ю. Е., Шабунин С. Н. // *Определение постоянных распространения в круглом слоистом волноводе. Вестник УГТУ-УПИ. Серия радиотехническая. Теория и практика радиолокации земной поверхности. Екатеринбург: ГОУ ВПО УГТУ-УПИ, 2005. № 19 (71). С. 165-169.*
- [3] Князев С. Т., Мительман Ю. Е., Шабунин С. Н. *Применение аппарата функций Грина радиально слоистых структур к решению задач возбуждения, излучения и дифракции волн. Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 2010. Т. 13. № 4. С. 31-37.*

## **Теоретические расчеты спектров селективного радиочастотного эксперимента ЯМР MUSLE: возбуждение одиночных линий мультиплетов**

**Морозов Максим Геннадьевич**

**Черныш Юрий Ефимович**

**Южный федеральный университет**

**Синявский Геннадий Петрович, д.ф.-м.н.**

[morozov.rf.nmr@gmail.com](mailto:morozov.rf.nmr@gmail.com)

Предлагается новая методика – возбуждение одиночных линий мультиплета MUSLE (MUltiplet Single Line Excitation), осуществляемая путем облучения исследуемого образца с помощью селективного радиочастотного возбуждения.

В новом эксперименте используются комбинации двух импульсов – селективного и неселективного или двух селективных импульсов. Каждая схема применима для конкретной задачи динамического ЯМР. В работе рассмотрено применение методики для слабосвязанной спиновой системы типа AX, для которой приведены квантово-механические расчеты на основе специально разработанной математической модели, основанной на формализме операторов произведения. Рассмотрим пять возможных различных комбинаций импульсных последовательностей, используемых в методике MUSLE [1]:

$$1. \left(\frac{\pi}{2}\right)_x - t_1 - \left(\frac{\pi}{2}\right)_x (A^1) - t_2 \qquad 2. \left(\frac{\pi}{2}\right)_x (A^1) - t_1 - \left(\frac{\pi}{2}\right)_x - t_2$$

$$\begin{aligned}
& 3. \left(\frac{\pi}{2}\right)_x (A^1) - t_1 - \left(\frac{\pi}{2}\right)_x (X^3) - t_2 \quad 4. \left(\frac{\pi}{2}\right)_x (A^1) - t_1 - \left(\frac{\pi}{2}\right)_x (A^1) - t_2 \\
& 5. \left(\frac{\pi}{2}\right)_x (A^1) - t_1 - \left(\frac{\pi}{2}\right)_x (A^2) - t_2
\end{aligned}$$

Запись  $\left(\frac{\pi}{2}\right)_x (A^1)$  означает возбуждение одиночной линии мультиплета ядра А. Для описания действия селективных импульсов операторы представляются в виде линейной комбинации операторов

Для упрощения расчетов полагаем положительную константу связи и отсутствие химического обмена. В результате получаем следующий вид оператора плотности для у-компоненты намагниченности, соответствующей сигналу поглощения:

$$\begin{aligned}
\sigma_4^{набл} = & I_y^{A_1} \sin \omega_1 t_1 \cos \pi J_{AX} t_1 \sin \omega_1 t_2 \cos \pi J_{AX} t_2 - \\
& - I_y^{A_2} \cos \omega_2 t_2 \cos \pi J_{AX} t_2 - \\
& - I_y^X \cos \Omega_X t_1 \cos \pi J_{AX} t_1 \cos \Omega_X t_2 \cos \pi J_{AX} t_2 + \\
& + I_y^X \sin \Omega_X t_1 \cos \pi J_{AX} t_1 \sin \Omega_X t_2 \cos \pi J_{AX} t_2
\end{aligned}$$

После некоторых тригонометрических преобразований получаем следующее выражение:

$$\begin{aligned}
\sigma_4^{набл} = & 1/4 I_y^{A_1} [\sin(\omega_1 - \pi J_{AX}) t_1 + \sin(\omega_1 + \pi J_{AX}) t_1] \times [\cos(\omega_1 - \pi J_{AX}) t_2 - \cos(\omega_1 + \pi J_{AX}) t_2] - \\
& - 1/2 I_y^{A_2} [\cos(\omega_2 + \pi J_{AX}) t_2 + \cos(\omega_2 - \pi J_{AX}) t_2] - \\
& - 1/4 I_y^X [\cos(\Omega_X + \pi J_{AX}) t_1 + \cos(\Omega_X - \pi J_{AX}) t_1] \times [\sin(\Omega_X - \pi J_{AX}) t_2 + \sin(\Omega_X + \pi J_{AX}) t_2] + \\
& + 1/4 I_y^X [\sin(\Omega_X - \pi J_{AX}) t_1 + \sin(\Omega_X + \pi J_{AX}) t_1] \times [\cos(\Omega_X + \pi J_{AX}) t_2 + \cos(\Omega_X - \pi J_{AX}) t_2]
\end{aligned}$$

Схематическая структура двумерного спектра для данной импульсной последовательности представлена на рис. 1.

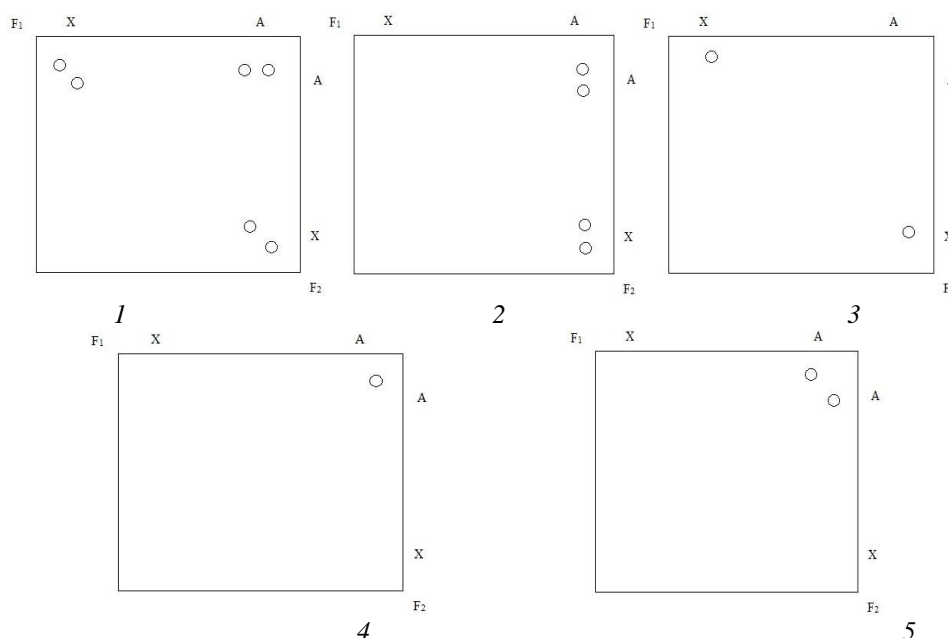


рис.1. Теоретические двумерные спектры для всех импульсных последовательностей эксперимента MUSLE

Показано, что предлагаемая новая методика приводит к значительному упрощению двумерных спектров ЯМР. Это позволяет изучить химические процессы и обмены спиновыми состояниями путем отслеживания динамического поведения мультиплетной структуры связанных ядер.

Список публикаций:

[1]. Морозов М.Г., Черныш Ю.Е., Сиявский Г.П. // Электромагнитные волны и электронные системы. 2015. Т.20.№6.С.85.